SSHモデルの線形な電子格子相互作用からのずれによるソリトン・ポーラロンのエネルギー補正

平井, 茂

物性研究 44－4 (1985－7)

SSHモデルの線形な電子格子相互作用からのずれによるソリトン・ポーラロンのエネルギー補正

平 井 茂

(1985年3月9日受理)

I 問題点と方法

SSHモデル，及びそれを連続体に移行したTLMモデルを用いて，ポリアセチレンのソリトン・ポーラロンなどの素励起の性質が調べられている[1,2]。

$$H_{\mathrm{SSH}}=-\sum_n t_{n+1,n}(c_{n+1}^{+}c_n+c_n^{+}c_{n+1})+\frac{1}{2}\sum_n K(u_{n+1}-u_n)^2 \tag{1}$$

$$t_{n+1,n}=t_0-\alpha(u_{n+1}-u_n) \tag{2}$$

トランスファ積分の格子変位に関して高次の展開項を考えると

$$t_{n+1,n}=t_0-\alpha(u_{n+1}-u_n)-\beta(u_{n+1}-u_n)^2-\gamma(u_{n+1}-u_n)^3 \tag{2'}$$

(2)′ を (1) に代入して連続体に移行すると[4] TLMハミルトニアンと，付加項として次式を得る。a は格子定数。

$$\int \mathrm{d}x\,\Psi^{\dagger}(x)\left[\,\mathrm{i}\,g_1\,a\,\Delta^2(x)\,\sigma_3\frac{\partial}{\partial x}+g_2\,\Delta^3(x)\,\sigma_1\right]\Psi(x)$$

$$g_1=\frac{\beta}{\alpha^2}\qquad\qquad g_2=\frac{\gamma}{2\alpha^3} \tag{3}$$

ここでは g_2 項のみの効果を調べる。g_2 項を摂動として，ソリトン・ポーラロンのエネルギー補正を求める。

$$H_0=H_{\mathrm{TLM}}$$

$$H=H_0+H'$$

$$=\int \mathrm{d}x\,\Psi^{\dagger}(x)\left[-\mathrm{i}\,v_{\mathrm{F}}\,\sigma_3\frac{\partial}{\partial x}+\Delta(x)\,\sigma_1+g\,\Delta^3(x)\,\sigma_1\right]\Psi(x)$$

$$+\frac{1}{\pi v_{\mathrm{F}} \lambda} \int \Delta^2(x)\, \mathrm{d}x \tag{4}$$

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} .$$

電子グリーン関数を用いて摂動エネルギーは求められる[5)]。

$$G_{ij}(xx'\tau) = -< T_\tau \psi_i(x\tau) \psi_j^\dagger(x'\,0) >_{H_0} \tag{5}$$

〔1次摂動〕

$$\Delta E_\alpha^{(1)} = 2g \int \mathrm{d}x\, \Delta_\alpha^3(x)\, (\sigma_1)_{ij}\, G_{ji}^\alpha(xx0)$$

$$= -\frac{2g}{\pi v_{\mathrm{F}} \lambda} \int \Delta_\alpha^4(x)\, \mathrm{d}x \tag{6}$$

α は完全結合交替，ソリトン・ポーラロンなどの系の状態を表わす指標。(6)で，H_0 から断熱近似の下に得られるSC方程式を利用した[7)]。

$$(\sigma_1)_{ij}\, G_{ji}{}^\alpha(xx0) = -\frac{1}{\pi v_{\mathrm{F}} \lambda}\, \Delta_\alpha(x) \tag{7}$$

〔2次摂動〕

$$\Delta E_\alpha^{(2)} = g^2 \int \mathrm{d}\tau\, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}x' (\sigma_1)_{ij} (\sigma_1)_{mn}\, G_{jm}(xx'\tau) G_{ni}(x'x-\tau) D^3{}_\alpha(xx'\tau)$$

$$\sim g^2 \int \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \int \mathrm{d}x\, \mathrm{d}x'\, \Delta^3{}_\alpha(x)\, \Delta^3{}_\alpha(x')\, \mathrm{Tr}\,[\sigma_1 G(xx'\omega) \sigma_1 G(x'x\omega)] \tag{8}$$

(8)でフォノン線はエネルギーを運ばないという近似をした。

$$D_\alpha(xx'\tau) \equiv < \mathrm{T}_\tau\, \Delta_\alpha(x\tau) \Delta_\alpha(x'0) >_0$$

$$\sim \Delta_\alpha(x)\, \Delta_\alpha(x') \tag{9}$$

II 計算と結果

1. 結合交替した基底状態

$$\varDelta E_D^{(1)} = -\frac{2g\varDelta_0^{\;4}}{\pi v_{\mathrm{F}} \lambda} L \;, \qquad \varDelta_0 = W \mathrm{e}^{-1/\lambda}$$

$$\varDelta E_D^{(2)} = -\frac{g^2 \varDelta_0^{\;6}}{\pi v_{\mathrm{F}}} \left(\frac{1}{\lambda} - 1 \right) L \tag{10}$$

この場合は，系の全エネルギーは厳密に求められ，g について展開して(10)が導かれる。

$$\varDelta E_D = E_D[\varDelta] - E_D[\varDelta = 0]$$

$$= -\frac{L}{\pi v_{\mathrm{F}}} \left[\varDelta'^{\,2} \ln \frac{W}{\varDelta'} + \frac{1}{2} \varDelta'^{\,2} - \frac{1}{\lambda} \varDelta^2 \right], \quad \varDelta' = \varDelta (1 + g\varDelta^2)$$

$$= \sum_{n=0} \varDelta E_D^{(n)} \tag{11}$$

$$\left. \frac{\partial \varDelta E_D}{\partial \varDelta} \right|_{\varDelta = \varDelta_0} = 0 \quad \text{より}$$

$$\varDelta_0 (1 + g\varDelta_0^{\;2}) = W \exp \left\{ \frac{-1}{\lambda (1 + g\varDelta_0^{\;2})(1 + 3g\varDelta_0^{\;2})} \right\}$$

2\. ソリトン・ポーラロンをもつ状態

〔1次摂動〕 Appendix により $\int \varDelta^4(x)\, \mathrm{d}x$ を計算する。

i) ソリトン[3)]

$$\varDelta E_S^{(1)} = \varDelta E_D^{(1)} + \frac{16 g \varDelta_0^{\;2}}{3\pi\lambda} \varDelta_0 \tag{12}$$

ii) ポーラロン[8)]

$$\varDelta E_{\mathrm{p}}^{(1)} = \varDelta E_D^{(1)} + \frac{32 g}{3\pi\lambda} (\varDelta_0^{\;2} + 2\omega_0^{\;2}) k_0 v_{\mathrm{F}} - \frac{16 g}{\pi \lambda} \omega_0^{\;2} \varDelta_0 \, \mathrm{th}^{-1} \frac{k_0 v_{\mathrm{F}}}{\varDelta_0} \tag{13}$$

○ポーラロン安定解　$\omega_0 = \varDelta_0 / \sqrt{2}$ (トランス型)

$$\varDelta E_{\mathrm{p}}^{(1)} = \varDelta E_D^{(1)} + \frac{32 g \varDelta_0^{\;2}}{3\pi\lambda} \frac{\varDelta_0^{\;2}}{v_{\mathrm{F}}} \sqrt{2} \left(\frac{v_{\mathrm{F}}}{\varDelta_0} - \frac{3}{4} x_0 \right)$$

$$\sim \varDelta E_D^{(1)} + 1.5 \times \frac{16 g \varDelta_0^{\;2}}{3\pi\lambda} \varDelta_0 \tag{14}$$

○遠くはなれた S$\bar{\mathrm{S}}$ 対[6]　$\omega_0 \sim 2\Delta_0\, e^{-\frac{\Delta_0}{v_F}2x_0}$

$$k_0 v_F \sim \Delta_0 (1 - 2e^{-2\frac{\Delta_0}{v_F}2x_0}) \qquad d = 2x_0$$

$$\Delta E_{S\bar{S}}^{(1)} \sim \Delta E_D^{(1)} + 2\frac{16 g \Delta_0^2}{3\pi\lambda}\Delta_0 + V_{S\bar{S}}^{(1)}(d) \tag{15}$$

$$V_{S\bar{S}}^{(1)}(d) = \frac{16 g \Delta_0^2}{\pi\lambda}\Delta_0 (1 - \frac{d}{\xi_0})\, e^{-2\frac{d}{\xi_0}} \tag{16}$$

iii) 2ポーラロン[9,10]

$$\Delta E_{2p}^{(1)} = \Delta E_D^{(1)} + \frac{32 g}{3\pi\lambda}(\Delta_0^2 + \omega_1^2 + \omega_2^2)(k_1 + k_2)v_F$$

$$- \frac{8 g}{\pi\lambda}(\omega_1^2 + \omega_2^2)\Delta_0 (\mathrm{th}^{-1}\frac{k_1 v_F}{\Delta_0} + \mathrm{th}^{-1}\frac{k_2 v_F}{\Delta_0}) \tag{17}$$

○遠くはなれた PP 対　$k_1 = k_0 + \frac{1}{2}\delta k$

$$k_2 = k_0 - \frac{1}{2}\delta k \qquad d = \frac{1}{k_0}\ln\frac{4k_0}{\delta k}$$

$$V_{PP}^{(1)}(d) = -\frac{64 g}{3\pi\lambda}(k_0 V_F)^3 [8(1 - \frac{3}{2}\frac{x_0}{\xi_0}) + 3\frac{\Delta_0^2}{\omega_0^2}]\, e^{-2k_0 d}$$

トランス型 PA　$\omega_0 = \Delta_0/\sqrt{2}$

$$\sim -\frac{16 g \Delta_0^2}{\lambda}\Delta_0\, e^{-\sqrt{2}\frac{d}{\xi_0}} \tag{18}$$

iv) ソリトン格子[11]

$$\Delta E_{SL}^{(1)} = -\frac{2g}{\pi v_F \lambda}\frac{1}{3}\frac{\Delta_k^4}{k^2} L [(1 + \frac{2}{k^2}) - 2(1 + \frac{1}{k^2})\frac{E(k)}{K(k)}] \tag{19}$$

$$n = \frac{|\rho - 1|}{a} = \frac{\Delta_k}{2kK(k)} \qquad \Delta_k = k^{1/2}\Delta_1$$

$$\Delta_1 = W e^{-1/\lambda} \qquad k^2 = 1 - \frac{2E(k)}{K(k)} + \frac{\pi^2}{4K^2(k)}$$

$K(k)$, $E(k)$ は第１種，第２種の完全楕円積分

$$n \ll \frac{\Delta_1}{V_F}\,,\quad k \simeq 1 \qquad \Delta E_{SL}^{(1)} = \Delta E_D^{(1)} + \frac{16 g \Delta_0^{\,2}}{3\pi\lambda} \Delta_0 \, n L$$

〔２次摂動〕　ソリトンの場合のみ計算[5]　$\Delta_s(x) = \Delta_0 \operatorname{th} \frac{x}{\xi_0}$　を (8) に代入

$$\Delta E_s^{(2)} = \Delta E_D^{(2)} - \frac{(g\Delta_0^{\,2})^2}{12\pi^2}\left(\frac{W}{\Delta_0}\right)^4 \Delta_0 + g^2 O(W^3, W^2, W, \ln W, 1) \quad (20)$$

大きな因子 $\left(\frac{W}{\Delta_0}\right)^n$ $(n \leqq 4)$ が現れる。

Ⅲ　まとめ

トランスファ積分の格子変位について３次の依存性は，断熱近似を用いて，１次摂動についてのみ考えると，次のような効果を与える。式 (12)，(14) より，ソリトンとポーラロンとの生成エネルギーの差をひろげる。(16) より，荷電ソリトン同士の斥力相互作用を弱める。(17)，(18) より，シス型 PA におけるバイポーラロン同士の斥力相互作用を弱める。ポーラロンとバイポーラロンとの間には補正相互作用は働かない。

Appendix

ソリトン・ポーラロンの存在する系の格子変位パラメータは変形された KdV 方程式をみたす。$v_F \equiv 1$

$$\Delta'''(x) - 6\Delta^2(x)\,\Delta'(x) + A\Delta'(x) = 0 \qquad \text{(A 1)}$$

(A 1) を積分して (B, C は積分定数)

$$\frac{d}{dx}(\Delta\Delta') - \Delta'^{\,2} - 2\Delta^4 + A\Delta^2 = B\Delta \qquad \text{(A 2)}$$

$$\Delta'^{\,2} - \Delta^4 + A\Delta^2 = 2B\Delta + C \qquad \text{(A 3)}$$

(A 2)，(A 3) より

$$\Delta^4 = \frac{1}{3}\left[\frac{d}{dx}(\Delta\Delta') + 2A\Delta^2 - 3B\Delta - C \right]$$

B, C は $\Delta(x)$ の $x \to \pm\infty$ の漸近値を (A 2)，(A 3) に代入して求められる。

2ポーラロン解の場合[9)]

$$A = 2(\Delta_0^2 + \omega_1^2 + \omega_2^2)$$

$$B = 2(\omega_1^2 + \omega_2^2)\Delta_0 \qquad C = \Delta_0^4 - 2(\omega_1^2 + \omega_2^2)\Delta_0^2$$

ソリトン・ポーラロン共存系のような2つの禁止帯をもつ場合，$\Delta(x)$は（A 1）をみたさない[12)]。例えば，1ソリトン・1ポーラロン共存解の場合[13)]

$$\Delta''' - 6\Delta^2\Delta' + \omega^2(\Delta^2 - \Delta_0^2) + (2\Delta_0^2 + 3\omega^2)\Delta' = 0$$

参　考　文　献

1) W. R. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger, Phys. Rev. **B22** (1980) 2099–11
2) H. Takayama, Y. R. Lin-Liu and K. Maki, Phys. Rev. **B21** (1980) 2388–93
3) S. Kivelson, T.K. Lee, Y.R. Lin-Liu, I. Peschel and L. Yu, Phys. Rev. **B25** (1982) 4173–84
4) J. Hara and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 2128–39
5) J. C. Hicks and A. L. Wassermann, Phys. Rev. **B15** (1984) 808–13
6) J. C. Hicks and Y. R. Lin-Liu, Phys. Rev. **B15** (1984) 6184–87
7) J. C. Hicks and G. A. Blaisdell, Phys. Rev. **B15** (1985) 919–26
8) D. K. Campbell, A. R. Bishop and K. Fesser, Phys. Rev. **B25** (1982) 6862–74
9) Y. Onodera and S. Okubo, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 2478–84
10) Y. Onodera, Phys. Rev. **B15** (1984) 775–85
11) S. A. Brazovskii, S. A. Gordyunin and N. N. Kirova, JETP Letters **20** (1980) 456–61
12) S. A. Brazovskii, I. E. Dzyaloshinskii and N. N. Kirova, JETP **54** (1981) 1209–16
13) S. Okuno and Y. Onodera, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 3495–505